

⑪ 公開特許公報(A)

昭61-171435

⑫ Int.Cl.⁴

C 07 B 61/00
G 06 F 15/20

識別記号

庁内整理番号

7188-4H
Z-6619-5B

⑬ 公開 昭和61年(1986)8月2日

審査請求 未請求 発明の数 2 (全27頁)

⑭ 発明の名称 有機化合物名の表記方法及びその装置

⑮ 特 願 昭60-281843

⑯ 出 願 昭60(1985)12月14日

優先権主張 ⑰ 1984年12月14日 ⑱ 米国(U S) ⑲ 681688

⑳ 発 明 者 玉 野 泰 三 伊丹市桜ヶ丘2丁目3番21号

㉑ 発 明 者 平 山 健 三 神奈川県足柄上郡松田町庶子720番地

㉒ 出 願 人 サントリー株式会社 大阪市北区堂島浜2丁目1番40号

㉓ 代 理 人 弁理士 志賀 富士弥

明 細 書

1. 発明の名称

有機化合物名の表記方法及びその装置

2. 特許請求の範囲

(1) すべての有機化合物を4種の基本構造の水素化合物の単または複数の複合体とみなし、主構造部分から修飾構造部分へと放射状に表記する有機化合物名の表記方法。

(2) 輪状に縮合したベンゼン環様の骨格原子の連続構造、縮合または単独のベンゼン環様の骨格原子の連続構造、架橋を含む輪状の骨格原子の連続構造、および分岐を含む鎖状の骨格原子の連続構造で骨格原子には論理値の水素が結合したものを4種の基本構造の水素化合物とする特許請求の範囲第1項に記載した方法。

(3) 基本構造の水素化合物名称に骨格原子の種類、骨格原子間の結合関係の変更を宣言することによつて有機化合物を特定する特許請求の範囲第1項又は第2項に記載した方法。

(4) 輪状の 造については、最大骨格原子数を含

む輪を主輪とし、付与する骨格原子番号の橋頭部の番号を昇順に配列した時に小番号が早く出現する方の番号を採用する特許請求の範囲第1項乃至第3項のいずれかに記載した方法。

(5) 分岐を含む鎖状の構造については、最大骨格原子数を含む鎖を主鎖とし、付与する骨格原子番号の分岐部の番号を昇順に配列した時に小番号が早く出現する方の番号を採用する特許請求の範囲第1項乃至第4項のいずれかに記載した方法。

(6) ベンゼン環に属する骨格原子の番号を環番号と標準化した環内の番号の組合せによつて表記する方法、および骨格原子の付加をする場合はその記号も加えた組合せによつて表記する特許請求の範囲第1項に記載した方法。

(7) 輪状に縮合したベンゼン環様の構造については、隣接する両側の環との関係を3種類に分類し、これを記号化して構造を表記する特許請求の範囲第1項乃至第6項のいずれかに記載した方法。

(8) 輪状でない縮合したベンゼン環様の構造については、先行する鎖状のベンゼン環の連続部分に

接合する関係を8方向に標準化し、この方向を示す記号と環番号の組合せを用いて構造を表記する特許請求の範囲第1項乃至第7項のいずれかに記載した方法。

(9) 先行する主骨格部分とその置換骨格部分の結合関係を、先行する骨格の骨格原子番号、結合様式を示す記号および置換骨格部分の骨格原子番号により表記する特許請求の範囲第1項乃至第8項に記載した方法。

(10) 結合する骨格原子を特定しないマーカッシュ構造の場合は、骨格原子番号の代りに特定しないことを意味する記号を用いる表記の特許請求の範囲第1項乃至第9項のいずれかに記載した方法。

(11) 有機化合物を命名するための予め定められた規則と、該化合物を構成する各構成要素に予め定められた名称とを記憶する記憶手段と、命名する有機化合物に関するデータを入力する入力手段と、前記入力手段を通して入力されるデータを前記各構成要素を示すデータに分解し、各分解されたデータと前記予め定められた名称に基づいて各構成要素を命名

し、かつ各構成要素に与えられた名称を前記予め定められた規則に従って結合して前記有機化合物の名称を決定するデータ処理手段と、及び前記データ処理手段にて決定された名称を表示する表示手段とにて成ることを特徴とする有機化合物名の表記装置。

(12) 前記記憶手段は、前記データ処理手段にて決定された名称を前記有機化合物に関するデータと対応して記憶する記憶領域を有していることを特徴とする特許請求の範囲第11項に記載した装置。

(13) 前記入力手段は前記有機化合物に関するデータとして、前記化合物の化学構造式の入力を許容することを特徴とする特許請求の範囲第11項又は第12項に記載した装置。

(14) 前記記憶手段は前記各構成要素中の前記有機化合物の基本構造を構成する要素の予め定められた名称を記憶する第1の記憶領域と置換構造を構成する要素の予め定められた名称を記憶する第2の記憶領域とを有していることを特徴とする特許請求の範囲第11項乃至第13項に記載した装置。

3. 発明の詳細な説明

産業上の利用分野

(背景)

本発明は、有機化合物名の表記方法及びその装置に関し、特に化学構造式の線型表記の方法について全有機化合物に適用する一貫性のある規則性を付与し、それを表現する百余の基本語とその文法を体系化したもので、化学構造式の極めて簡潔な新しい線型表記法であると同時に自然語による表記である。

従来の技術

有機化合物の分子構造が研究され始めてから二百余年になるが、当座は統一的理念なしにまたその分子構造に無関係に独自に有機化合物の名称を付けていたため、学術上と産業上に混乱をきたした。

この問題を解決すべく分子構造に基づく名称を制定する機運が高まり、A.D. 1892年に最初の国際提案(いわゆるジュネーブ規則)があつた。しかしこの提案は一部の有機化合物にしか適用で

きないのみならず理論的統一性のない不備なものであつたので、化学国際連合(現在の純正応用国際化学連合)が委員会を構成し、今日も命名の規則作りに努めている。

これによつてIUPAC命名法(IUPAC NOMENCLATURE RULE)としての確固たる体系の完成をすべく努力されているが、新型の有機化合物が出現するたびの細部にわたる改訂と補修が加えられてきたため、この命名法に全体を通じる規則の一貫性が乏しくなり、これを補うため千余の基本語と三百頁を超える規則書になつた。その結果、命名専門家にとつては有用な道具であつても、例えば新入学生にとつては文法のむづかしい「バス語」となっている。

一方、化学工業・研究のために今や六百万個を超える有機化合物の情報が多用される時代になっているが、最近の情報器械としてのコンピュータの発展にもかかわらず、全有機化合物の化学構造式についての一貫性のある命名方法でかつ「自然語」に準拠するものが無いため、化学構造式と有

機化合物名の関係付けをするためにコンピュータ処理では化学構造式とは無関係のある種の背番号を用いる方法も採用されている。

今までに、論理一貫性のある広分野の化学構造式の線型表記法として THE WISWESSER LINE-FORMULA CHEMICAL NOTATION (一般に W L N 法と略称している) と研究では NODAL NOMENCLATURE (N&L Losac'h Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 18, 887-899 (1979); 23 (1984) 33-46) がある。

名称と化学構造式の相互間の一義的対応については前者は良好との評判のものであり、後者はそれがあると類推する。

発明の解決しようとする問題点

W L N 法は高度に文字記号化した線型表記方法でコンピュータでの情報処理に適合性があるものの、「自然語」でないので人間同士の情報交換には適していない。

後者の NODAL NOMENCLATURE に一義的対応性があると類推したのは、この方法が化学構造式の骨

するために、有機化合物の命名に所定の規則性を与えて、簡単で、かつ一義的に命名を行ない得るようにしようとするを目的とする。

問題を解決するための手段

本発明による有機化合物名の表記方法によれば、すべての有機化合物を4種の基本構造の水素化物の単または複数の複合体とみなし、主構造部分から修飾構造部分へと放射状に表記する。

また、本発明の方法によれば、輪状に縮合したベンゼン環様の骨格原子の連続構造、縮合または単独のベンゼン環様の骨格原子の連続構造、架橋を含む輪状の骨格原子の連続構造、及び分岐を含む鎖状の骨格原子の連続構造で骨格原子には論理値の水素が結合したものを4種の基本構造の水素化物とする。基本構造の水素化物名称に骨格原子の種類、骨格原子間の結合関係の変更を宣言することによつて有機化合物を特定する。

輪状の構造については、最大骨格原子数(輪状に縮合したベンゼン環様の場合はベンゼン環の数)を含む輪を主輪とし、付与する骨格原子番号(ベ

格構造を構成する最小要素を原子に置き、それらの相互関係を線型表記する方法で、本発明と類似しているが、全化合物への適用がまだ具体化されていないと同時にコンピュータによる情報処理に対する配慮が十分でない。

I U P A C 法では鎖状の炭化水素は炭素数が1から4までは各々 methane, ethane, propane, butane と発生の化合物名が用いられ、5以上になると数詞を用いた名称が付けられている。分岐の炭化水素になると、規則により主鎖とする炭化水素と修飾する炭化水素基の名称の組合せで命名されており、3-methylhexane はその簡単な化合物名称の事例である。ただし、この方法は基本骨格が同じでも不飽和結合が存在すると主鎖の選択の基準がかわる為に名称上に共通性を無くする。例として、4-methyl-1-hexene, 2-ethyl-1-pentene, 2-propyl-1-butene-3-yne, 4-ethyl-1, 2, 4-pentatriene の4種の化合物はいずれも 3-methylhexane の不飽和化合物である。

本発明は、従来の命名法における問題点を解消

ンゼン環の場合は環番号)の橋頭部の番号を昇順に配列した時に小番号が早く出現する方の番号を採用する。

また、分岐を含む鎖状の構造については、最大骨格原子数(縮合したベンゼン環様の場合はベンゼン環の数)を含む鎖を主鎖とし、付与する骨格原子番号(ベンゼン環の場合は環番号)の分岐部の番号を昇順に配列した時に小番号が早く出現する方の番号を採用する。

またさらに、ベンゼン環に属する骨格原子の番号を環番号と標準化した環内の番号の組合せによつて表記する方法—及び骨格原子の付加をする場合はその記号も加えた組合せによつて表記する。輪状に縮合したベンゼン環様の構造については、隣接する両側の環との関係をも種類に分類し、これを記号化して構造を表記する。輪状でない縮合したベンゼン環様の構造については、先行する鎖状の連続部分に接合する関係を8方向に標準化し、この方向を示す記号と環番号の組合せを用いて構造を表記する。

先行する主骨格部分とその置換骨格部分の結合関係を、先行する骨格の骨格原子番号、結合様式を示す記号及び置換骨格部分の骨格原子番号により表記する。結合する骨格原子を特定しないマーカッシュ構造の場合は、骨格原子番号の代りに特定しないことを意味する記号を用いる。

また、本発明による有機化合物名の表記装置は、有機化合物を命名するための予め定められた規則と、該化合物を構成する各構成要素に予め定められた名称とを記憶する記憶手段と、命名する有機化合物に関するデータを入力する入力手段と、前記入力手段を通して入力されるデータを前記各構成要素を示すデータに分解し、各分解されたデータと前記予め定められた名称に基づいて各構成要素を命名し、かつ各構成要素に与えられた名称を前記予め定められた規則に従って結合して前記有機化合物の名称を決定するデータ処理手段と、及び前記データ処理手段にて決定された名称を表示する表示手段とにて構成する。

前記記憶手段は、前記データ処理手段にて決定

号3より分岐することを示し、その後の1は骨格原子数1の鎖が延びていることを示す。またこの分岐した枝部の骨格原子番号は主鎖の番号「6」に続く「7」である。従つて骨格原子数7を示す“hepta”と骨格原子の種類が炭素である“carb”及び分岐を含む鎖状の構造である後綴“an”を用いることによつて hepta〔6.(3)1〕carbane と命名する。前出の不飽和化合物は各々 hepta〔6.(3)1〕carbane に続けて“5-one”、“3:7-one”、“3:7-en-1-yne”、“3:7,4:6-triene”と命名する。2重結合は“en”、3重結合は“yne”と表記し、「3:7」は骨格原子番号3と7の間「4::6」は4と5、5と6の間を示す。

前記の場合の骨格原子をベンゼン環とした場合が縮合したベンゼン環様の構造である。単位がベンゼン環であるので、分岐するベンゼン環への縮合に第1図に示す規則を付与し、ベンゼン環が単位であることを示す後綴“aren”を用いることで命名する。即ち triphenylene は tetra〔2.(2A)

された名称を前記有機化合物に関するデータと対応して記憶する記憶領域を有している。また、前記入力手段は前記有機化合物に関するデータとして、前記化合物の化学構造式の入力を許容する。

更に、前記記憶手段は前記各構成要素中の前記有機化合物の基本構造を構成する要素の予め定められた名称を記憶する第1の記憶領域と置換構造を構成する要素の予め定められた名称を記憶する第2の記憶領域を有している。

本発明によれば、骨格原子で連続する構造部分を単位としてとらえ、直鎖、分岐の化合物を同一の規則で包括して表現する方法を用いる。即ち、化合物中の最も長い鎖に固有の骨格原子番号を付与し、分岐する骨格原子と分岐する鎖の長さを指定することとで対応できる。前出の3-methylhexane の場合は〔6.(3)1〕もしくは〔6.(4)1〕の複数の構造表記が存在するので、分岐する原子番号を昇順に配列した時に早く小番号が出現するものを選択する規則を設けることによつて〔6.(3)1〕を唯一の構造表現とする。(3)は骨格原子番

1.(2H)1〕carbarene pyrene は tetra〔2.(1-1A)2〕carbarene となる(通常は骨格原子が炭素であるので、carb は省略する)。

架橋を含む輪状の水素化合物は前述の分岐を含む鎖状構造の主鎖が輪状になつたもの、及び分岐する鎖状部分が架橋になつたものに相当し、形成する輪の数を示す数詞及び輪を示す“cyclo”を付加して命名する。tricyclo〔5.4.0.0〕undecane は骨格原子を最も多く含む輪の原子数は11であり、構造は〔11.(1:5)0.(2:7)0〕、〔11.(1:8)0.(6:11)0〕などがあるが、橋頭原子番号を昇順に配列した場合に早く小番号が出現する方を選択するので〔11.(1:5)0.(2:7)0〕が正しい構造表記であり、tricycloundeca〔11.(1:5)0.(2:7)0〕arene が本法の名称になる。

輪状に縮合したベンゼン環様の構造は、この方法の骨格原子をベンゼン環とみなしたものに相当する。第2図に示す隣接するベンゼン環間の関係を付記することによつて命名する。第3図に示す

化合物はIUPAC法によつては命名が困難なものであるが、本命名法ではcycloocta〔8〕〔4(MP)〕areneとなる。

以上の4種の基本構造を持つ水素化合物を無修飾水素化合物と称するが、これらの命名は以下に示す定型式に該当事項を充当して行なり。

〔輪の数〕〔輪を意味する記号〕〔骨格原子数
(ベンゼン環を単位とする場合はその数)〕〔構造表示〕〔ベンゼン環が縮合して輪を形成する場合の構造補助表示〕〔骨格原子の種類〕〔無修飾水素化合物の分類表示〕

(無修飾水素化合物の修飾)

1) 骨格原子間の結合数の修飾

骨格原子を構造表示の単位とする場合は二重結合化、三重結合化を各々指定する記号を用い、ベンゼン環を単位とする場合は、無結合化、単結合化、三重結合化、異なるベンゼン環の骨格原子間の単結合化を各々指定する記号を用い(骨格原子の号)〔:〕〔骨格原子の番号〕〔修飾を特定する記号〕を無修飾水素化合物の名称に続けて表記

(複数の部分構造で構成される化合物の名称)

1) 主核の決定

本命名法では無修飾水素化合物に前述の修飾をしたものを部分構造と定義する。部分構造の内主核の決定は特許請求の範囲2項に記載した無修飾水素化合物の順で優先し、同じ無修飾水素化合物の場合は骨格原子数の多いものが優先する。また、同じ骨格原子数の場合は主鎖または主輪の大きいものが優先する。

2) 部分構造の結合表示

部分構造間の結合はすべて先行表示する部分構造名称に続いて〔先行する部分構造の骨格原子番号〕〔結合様式を特定する記号〕〔後続する部分構造の骨格原子番号〕〔後続する部分構造名称〕の順に表記する。

3) 骨格原子が1個の部分構造の扱い

メタン分子や水分子などの水素化合物は分岐を含む鎖状の無修飾水素化合物の内骨格原子が1個の場合とみなすが、この部分構造に他の部分構造が後続しない場合は〔先行する部分構造の骨格原子

する。

2) 骨格原子の挿入、削除の修飾

ベンゼン環を単位とする場合は縮合内部の骨格原子の削除、外縁部の骨格原子の削除、骨格原子の挿入の各々指定する記号を用い、既に表記した命名に続いて〔対象とする骨格原子の番号〕〔挿入した骨格原子であることを示す記号〕〔修飾を特定する記号〕を表記する。

3) 骨格原子の入れ換え

分岐を含む鎖状の基本構造以外の基本水素化合物については、無修飾水素化合物の命名で特定した骨格原子の一部を他原子で入れ換えでき、この場合は〔対象の骨格原子の番号〕〔原子を特定する記号〕を続けて表記する。

4) 同じ修飾の重複

同一の無修飾水素化合物に同一の修飾が重複する場合は〔重複数を示す数詞〕〔修飾を特定する記号〕の形式で短縮表記する。この場合には対象とする骨格原子もしくは結合は「,」で区切つて列記する。

番号)〔後続する骨格原子の種類を特定する記号〕〔結合様式を特定する記号〕の順に表記する。

4) 同じ結合様式の重複

同一の先行部分構造と同一の後続部分構造の間に同一の結合様式の重複がある場合は〔重複数を示す数詞〕〔結合様式を特定する記号〕によつて短縮表記する。この場合には先行構造部分の骨格原子番号及び後続部分構造の骨格原子番号は各々「,」で区切つて列記する。

実施例

本発明の好適実施例による有機化合物の命名法について説明する前に、本発明による方法の基本思想を詳細に説明する。

本発明によれば、命名される有機化合物は、個々の構成要素に分解される。分解された構成要素中より基本構造を形成している要素を抽出し、これを所定の規則により命名する。次いで、前記の基本構造を構成する構成要素以外の、置換構造を形成する構成要素について個別に命名し、これを所定の順序で結合して、最終的名称を決定する。

以下に、上記の命名過程における各段階について詳述する。

1. 化学 造の構成要素への分解

化学構造は、以下のごとく構成要素に分解する。

- (1) 水素以外の全ての原子を骨格原子とする。
- (2) 骨格構造を下記のごとく構成要素に分解する。即ち、分解する構造の選択が可能なら、最も少ない構成要素が得られるような選択を行なう。
- (3) 四から八個の環から形成され、隣接する2つの環が共通した2個の原子のみ有するじゆず形環式構造は、Ⅳ群とする。
- (4) 六員環のハニカム状縮合系、及び非隣接二重結合の最大数を有する四あるいは八員の膨張あるいは収縮した周辺環の発展系を、プロセス(3)以後の残りからⅢ群として分類する。
- (5) プロセス(4)以降の残りから、環状部分をⅡ群として分類する。
- (6) プロセス(5)以降の残りて、同一原子の連続体をⅠ群とする。

四群の構成要素は、基本骨格とそれらの発展形

という順に引用するためのもので、式 $A + B + \dots$ は用語の A, B, \dots という順に引用するためのものである。

(3) 基本骨格の名称

各基本骨格の名称は、表1に基づき次の式中のバリエアブルを引用することで得られる。

(基本骨格の名称)

$$= A + B + C + \left[\sum_{a=1}^b D_a \right] + \left[\sum_{c=1}^d E_c \right] + F + G + H \dots \quad (2)$$

以下余白

へと、以下のごとく分類する。

- a. 非隣接二重結合の最大番号を有し、同一原子の六員環のみで構成されるⅢ、Ⅳ群の骨格が基本骨格で、この群の他の構成要素は基本骨格の発展形である。
- b. 一重結合により互いに結合した一種類の原子から成るⅡ群の骨格を基本骨格とし、この群の他の構成要素はこの基本骨格の発展形である。
- c. 一重結合のみにより構成されるⅠ群の骨格を基本骨格とし、Ⅰ群の他の構成要素はこの基本骨格の発展形である。

2. 構成要素の呼称

前記プロセスによつて得た各構成要素は、以下のように名称を与える。

(構成要素の名称) = (基本骨格の名称)

$$+ \sum_{g=1}^h (\text{発展形の表記})_g \quad \dots \quad (1)$$

式 $\sum_{g=1}^h$ は、第1バリエアブル(変化する物)、第2バリエアブル、……、第h番目のバリエアブル

表 1

バリエアブル	適用群	意 味	各バリエアブルの数値または用語
A	II, IV	環状の数	倍数詞第1シリーズ ^{*1}
B	II, IV	節のある環状の存在	用語 CYCLO
C	I, IV	節の数	倍数詞第1シリーズ ^{*1}
D	I, II, IV	環及び非分枝鎖のサイズ、及び分枝点の位置	節の数及び分枝点の位置指数
E	III, IV	環列の長さ、位置、引張り方向	環の位置指数、方向指数、環の数
F	I, II, III, IV	環の縮合	方向指数
G	I, II, III, IV	原子の種類	用語 ^{*2}
H	I, II, III, IV	原子の種類	用語 ^{*2}
		原子の種類	C A R Bは除く
		原子より成る骨格	用語 AN
		環より成る骨格	用語 AREN
		発展形、置換なし	用語 E
		発展形及び/あるいは置換あり	EN, YNの前には用語なく、他は用語O

*1 バリエアブル A, C の倍数詞第1シリーズを以下に示す。

以下余白

2ジ, 3トリ, 4テトラ, 5ペンタ, 6ヘキサ,
7ヘプタ, 8オクタ, 9ノナ, 10デカ, 11ウン
デカ, 12ドデカ, 13トリデカ, 14テトラ
デカ, 15ペンタデカ, 16ヘキサデカ, 17ヘ
プタデカ, 18オクタデカ, 19ノナデカ, 20
アイコサ, 21ヘンアイコサ, 22ドコサ, 23
トリコサ, 24テトラコサ, 25ペンタコサ,
26ヘキサコサ, 27ヘプタコサ, 28オクタコ
サ, 29ノナコサ, 30トリアコンタ, 31ヘン
トリアコンタ, 32ドトリアコンタ, 33トリト
リアコンタ, …… , 40テトラコンタ, 50ペ
ンタコンタ, 60ヘキサコンタ, 70ヘプタコン
タ, 80オクタコンタ, 90ノナコンタ, 100
ヘクタ, 200ジクタ, 300トリクタ, 400
テトラクタ, 500ペンタクタ, 600ヘキサク
タ, 700ヘプタクタ, 800オクタクタ,
900ノナクタ, 1000キャリア, 2000ジリ
ア, 3000トリリア

構成要素を示す用語は、C = carb, Si = sil,
Ge = germ, Sn = stann, Pb = plumb, B = bor,

N = az, P = phosph, As = ars, Sb = stib, Bi = bis
muth, Hg = mercur, O = ox, S = sulf, Se = sel,
Te = tell, Po = pol, F = fluor, Cl = chlor, Br = br
om, I = iod, At = astat.

(2) 基本骨格の発展形

発展形は次の機能を有する。

- 骨格原子間の結合状態の変化
- 骨格原子の追加あるいは削除
- 骨格原子を他の種類の構成要素の原子で部分的に交換

基本骨格の発展形は、表2に基づき次の式のバリエーションを引用することで表記する。

(発展形の表記)

$$= \sum_{g=1}^h \left(\sum_{i=1}^j I_i^{*j+K+L} \right)_g \quad \dots (3)$$

以下余白

表 2

バリエーション	連記群	意味	各バリエーションの指数あるいは用語
I	I ~ IV	基本骨格の発展位置	基本骨格の位置指数
J	I ~ IV	同一発展体の数	指数前綴1シ-ズ
K	I, II	発展体の種類 一重結合を二重結合に変更	用語 EN
	I, II	一重結合を三重結合に変更	用語 VN
	III	内部環の原子を水素添加除去	用語 DELE
	III	内部環の結合を水素添加除去	用語 BEC
	III, IV	環辺結合に原子を挿入	用語 HOK
	III, IV	非角環辺原子の除去	用語 NOR
	III, IV	2個の環原子の結合	用語 CYCL
	III, IV	二重結合を三重結合に変更	用語 DEHYDR
L	I ~ IV	二重結合を一重結合に変更	用語 HYDR
		骨格原子を他の種類の原子で交換	要素の用語
L	I ~ IV	発展形あるいは置換なし	用語 ADE
		さらに発展形および/あるいは置換あり	NOR以後用語なし 要素の用語以後の用語 他の用語以後の用語

3. 構成要素間のコアの選択

コアは、下記の基準を決定が終了するまで表記の順で適用させて、構成要素間で選択する。

この選択は、

- 群番号が最大の構成要素、
- 倍数詞で示されるバリエーションが最大の構成要素、
- 倍数詞で示されるバリエーションが最大の構成要素、
- バリエーション $\left[\sum_{a=1}^b D_a\right]$ の列が優先である構成要素、
- バリエーション $\left[\sum_{c=1}^d E_c\right]$ の列が優先である構成要素、等について行なう。

$\left[\sum_{a=1}^b D_a\right]$ あるいは $\left[\sum_{c=1}^d E_c\right]$ 列の優先性は、次のように決められる。

$\left[\sum_{a=1}^b D_a\right]$ あるいは $\left[\sum_{c=1}^d E_c\right]$ 列をバリエーション対バリエーションについて比較し、初めの相異に際して以下の基準によつて決まる優先バリエーションを有する

点にアルファベット順の名を付けて、置換成分を特定して命名する。

(化合物の名称) = (コアの名称)

$$\sum_{u=1}^v (\text{置換成分の名称})_u \quad (4)$$

コアはそれに結合する置換成分より優先する構成要素である。置換成分は、それに結合し、コアとその間に位置することのない他の置換成分に対して優先する。置換成分は、その優先置換成分の従属置換成分である。

コアの名称は、構成要素の名称で表わされる。

5. 置換成分の命名

各置換成分は、表3に基づき以下の式のバリエーションを引用して命名する。

(置換成分の名称) = (結合) + (成分の名称)

$$= \sum_{m=1}^n a_m + \beta + \sum_{q=1}^r (\gamma + \delta)_q + \sum_{s=1}^t e_s + (\text{成分の名称}) \quad (5)$$

らものである。

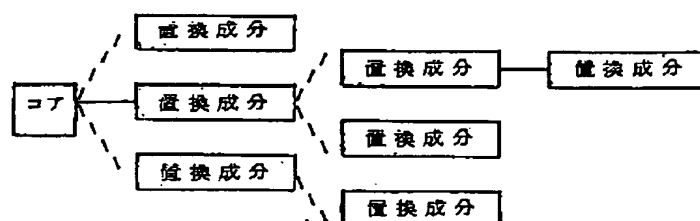
即ち、

- サイズまたは長さを表す数が大きい方が優先、
- 位置指数が小さい方が優先、
- 方向指数はアルファベット順で早い方が優先、
- 先行バリエーションの初めの部分を含むバリエーションに対し、優先、

4. 化合物の名称の構成

コア以外の構成要素は、全て置換成分である。

コアと置換成分間の結合関係は、以下の例のごとくである。



化合物は初めにコアを引用し、次いでコアに結合したものから各枝の端末まで1個ずつ、各分枝

表 3

バリエーション	意 味	各バリエーションの指数あるいは用語
α	置換成分が結合している優先要素における位置	優先要素の位置指数
β	同一置換成分の数	倍数詞第1シリーズ
γ	置換成分と優先要素間の同一結合の数	倍数詞第2シリーズ
δ	置換成分が優先要素と結合しているその結合の種類 a. 一価結合 b. 二価結合 c. 三価結合	用語 YL YLIDEN YLIDYN
ϵ	原子価結合が優先要素へ伸びる置換成分内の位置	置換成分内の位置指数

3. 以下に倍数詞第2シリーズのリストを示す。

2 bi	8 octoni	14 quaterdeni	20 viceni
3 ter	9 noveni	15 quideni	21 unviceni
4 quater	10 deni	16 sedeni	30 tercen
5 quini	11 undeni	17 septedeni	40 quatercen
6 seni	12 duodeni	18 octodeni	50 quiceni
7 septeni	13 terdeni	19 novezeni	60 seceni

表 4

変数	意 義	各変数の用途
δ	優先成分と結合する置換成分 のその結合の種類 a. 二価結合 b. 三価結合 c. 三価結合	用 語 ANT ENT INT

6. 単原子置換成分の命名

単原子基本骨格は、変数 A～L からの変数 F によつて表わすことができる。それは 1 個の骨格原子から成り、それ以上の発展形をもたないからである。従つて、単原子基本骨格から誘導される従属置換基を有する置換成分は、

$$\sum_{n=1}^k a_n + (\text{成分の名称})$$

の代わりに変数 F を用いた (5) 式で表わされる。すなわち、

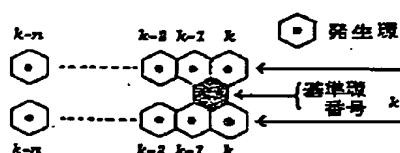
(置換基を有する単原子置換成分の名称)

$$= \sum_{n=1}^n a_n + \beta + \sum_{q=1}^F (\gamma + \delta) q + F \quad \dots (6)$$

単原子基本骨格から誘導した非置換置換基の場合、置換成分は表 3、表 4 に基づいた次式の変数を引用することと命名する。

(置換基なしの単原子置換成分の名称)

$$= \sum_{n=1}^n a_n + \beta + F + \sum_{q=1}^F (\gamma + \delta) q \quad \dots (7)$$



発生環は、環列の環の番号付けを開始する位置の環であり、横形環列の左端あるいは、主環列に最も近い斜形環列の環と説明できる。

環列の位置指数や方向数値を決定する基準環は、(I) 斜形環列のあらかじめ番号付けした環、あるいは (II) あらかじめ番号付けした横形環列でそれに環列が結合したものの左端環である。

骨格節が六角環である時、1 個以上の結合部分が節にあり、変数 V と記される。Ⅲ群の場合、環列の発生方向は下記のごとく A, B, C, D, E, F, G, H と特定し、Ⅳ群の場合はじゆず形環式の節の結合部分を下記のように M, P, V と特定する。

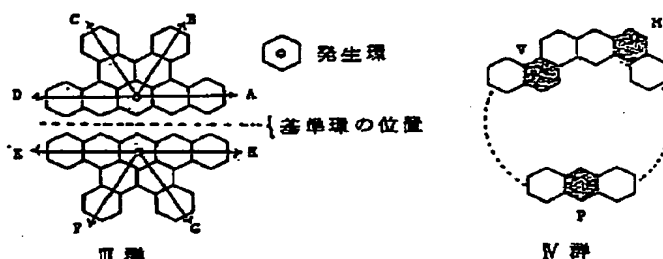
7. 複合変数

変数 D, E, I, α, ε 等はまだ詳細に説明しておらず、これらは次のごとく変数素子から成る。

(1) 変数素子

変数素子 R, S は節、すなわち骨格原子や環の位置指数を意味し、T は節状環の中の原子の位置指数を示す。変数素子 v は、以下に示すⅢ群の場合では、発生する節状環の位置指数を示す。

以下余白



変数素子 W は節の数を示す。すなわち、骨格原子あるいは骨格環の数である。

(2) 変数 D (a) 非分枝鎖のサイズ及び位置指数 I 群の場合、非分枝鎖の節の長さ、及び位置指数は変数 D で表わす。この変数は R と W という二種の変数素子から、

$$D_a = R_a W_a$$

のごとく成り、W_a は a 番鎖の節の数を示し、R_a は a 番鎖が発生していく節の位置指数を示している。位置指数は次のごとく定義する。

初めに、基本骨格の最長非分枝鎖を主鎖とし、その節に、枝別れる節の最も低い位置指数列が

得られるように一端の開始点を1として連続した位置指数を与える。

次に、主鎖から発生する枝の節に、主鎖の位置指数に連続的に従い、順に若い方から一枝づつ、つまり枝が発生する主鎖の節の位置指数の若い方から、位置指数を与える。

節の番号付けと変数 D_a の行列を示す例は以下のとおりである。変数素子 R_i は常に除外される。つまり、主鎖は他の鎖から枝別れていない。

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	a	R_a	W_a
													1	-	13
													2	3	2
													3	6	4
													4	17	1
													5	9	3

従つて、 D_a の指数列は

$$\left[\sum_{a=1}^5 D_a \right] = \{13^3 2^6 4^{17} 1^9\}$$

低い番号の節へ位置指数を与える。

以下に示した例は、節の番号付けと変数 D_a の行列である。変数素子 R_i が常に1で $S_i = W_i$ であるなら、 R_i と S_i は変数 D_i の指数列から除ける。

22 23 24 25 2 3 4 5

Diagram of a polymer chain structure with two rings. The left ring has nodes 18, 19, 20, 21. The right ring has nodes 2, 3, 4, 5. A bridge connects node 13 to node 26. Other nodes are 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17.

a	R_a	S_a	W_a
1	-	-	25
2	1	13	1

6 5 4 3 2 1 22 21

Diagram of a polymer chain structure with a complex structure including a ring and several branches. Nodes are numbered 1 through 30.

a	R_a	S_a	W_a
1	-	-	22
2	1	15	3
3	4	8	1
4	26	26	4

従つて、この例の変数 D_a の指数列は、

$$\left[\sum_{a=1}^2 D_a \right] = \{25^1, 13^1\}, \text{ および } \left[\sum_{a=1}^4 D_a \right] = \{22^1, 15^3, 4^8, 8^1, 26^2, 26^4\}$$

(3) バリابل D (b) 環式や橋かけ構造のサイズ及び位置指数 III 群及び IV 群の場合、節の環式や橋かけ構造のサイズ及び位置指数はバリابل D で示す。このバリابلは、

$$D_a = R_a S_a W_a$$

のごとく三種のバリابل素子から成り、 W_a は環式や橋かけ構造を有する a 番目の非分枝鎖の節の数を示し、 R_a 及び S_a は a 番目の鎖の両端にある節が結合している節の位置指数を示す。位置指数は次のように定義する。

まず、最大環状（主環状と呼ぶ）の節は、橋かけした節（橋を分枝する節）の位置指数の最低指数列が得られるように1から連続的に位置指数を与える。

次に、橋（非分枝あるいは分枝）の節は、主環状の節位置指数に従つて1個づつ連続的に、橋の橋かけした節の位置指数列（二指数以上あるなら二種の最低位置指数の列）の数の少ない順に位置指数を与える。各非分枝鎖の節は、端の結合から

である。

(4) バリابل E (a) III 群の場合

III 群の環列はバリابل E で表わされ、これは次のように三種のバリابل素子 U , V , W から成っている。

$$E_e = U_e + V_e W_e$$

W_e , U_e , V_e は、それぞれ第 e 番の環列における環の数、第 e 番の環列の発生環の位置指数、第 e 番の環列の発生方向を示す。

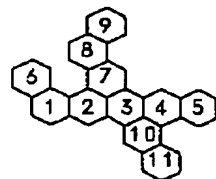
環列の環の番号付けは次のように行なう。

まず、基本骨格の最長環列を主環列とし、主環列に縮合している環列のバリابل $U + V$ の優先列を得るように主環列の一端を1として連続的に番号を付ける。

次に、主環列に縮合している各環房の環に、 $U + V$ の優先順で主環の番号に従つて番号を連続的にふる。

以下に示す例は環節の番号付けとバリابل E の行列である。バリابل素子 U_i , V_i は常に

省略する。これは主環があらかじめ番号付けをした環列ではなく、主環列の方向指数は常にAだからである。



ゆえに、 $[E_e]$ の指数列は

$$\left[\sum_{e=1}^5 E_e \right] = [5^1 1^1 A_1 2^1 C_2 3^1 A_1 3^1 G_2]$$

(5) バリアブル E (b) IV 群の場合

IV 群の環の縮合辺をバリアブル E で表わし、それはバリアブル素子 V で $E_e = V_e$ のように示す。

バリアブル V_e 列は前記の 7 (3) バリアブル D で定義した環番号の順に記述する。7 (3) の第一例の節番号に、次の二例の環番号は対応する。

以下余白

単環用のバリアブル E は、できるだけ優先して引用する。三番目の例は $[5^1 P_1 M P_2 P_1 M_2 P_1 M_2 P_1 M P_1]$ と表わす。

(6) バリアブル I, α , ϵ

これらバリアブルは位置指数であり、発展形の位置指数はバリアブル I で表わす。

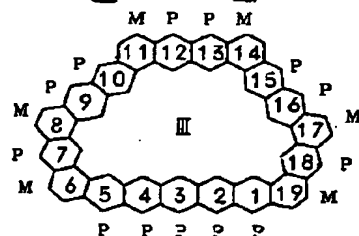
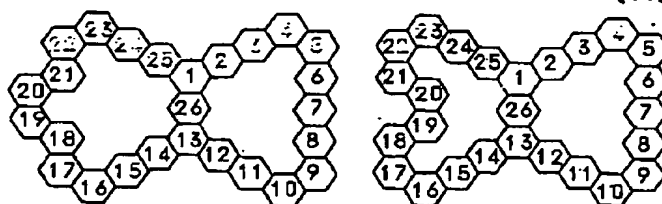
発展形が EN, YN, SEC, CYCL,あるいは DEHYDR で示される二足形環の時、バリアブル I は二種のバリアブル素子で表わされる。即ち、 $I = R : S$ で、ヘテロ原子による骨格原子の置き換えを示す DELE, HOM, NOR, HYDR, HETER 等の発展部分用の位置指数を、 $I = R$ のごとくバリアブル素子で示す。

同一発展形用のバリアブル列

$$\sum_{k=1}^L I_k$$

では、 $I'S$ はコンマで互いに離れる。

以下の例は、発展形 EN, HETER の位置指数を示すものである。

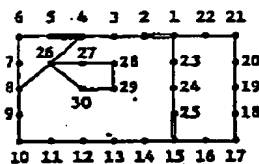


ゆえに、これらの例のバリアブル $\left[\sum_{e=1}^2 E_e \right]$ の列は

$[V P P M P P P M P P V P P M K V M V M K P P]$ および
 $[V P P M P P P M P P V P P M K V V M M K P P]$ である。

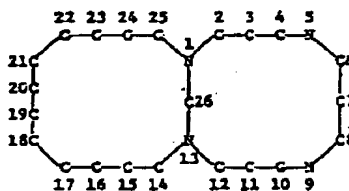
バリアブル E_e はピリオッドで互いに離れる。これらの指標は、同一指標が反復する回数を示すためアラビア数字を使って書き直すと、それぞれ

$[1^1 V_2 P N_3 P_2 M P_1 V_2 P N_1 V_2 M_1 V_2 M P_1 P]$ および
 $[1^1 V_2 P N_3 P_2 M P_1 V_2 P_3 M_2 V_3 M_2 P_1 P]$ となる。



k	R _k	S _k
1	1	1
2	4	5
3	15	25

$$\sum_{k=1}^3 I_k = 1, 2, 4, 5, 15, 25$$



k	R _k
1	1
2	5
3	9
4	13

$$\sum_{k=1}^4 I_k = 1, 5, 9, 13$$

自由電子価結合の位置指数を示すバリアブル α , ϵ は、同様に I で示す。

次に、本発明の好適実施例による有機化合物の表記装置を以下に説明する。

図 4 図は本発明の好適実施例による装置を示すブロック図である。データ処理装置 100 はコン

ビュータにて構成されており、このコンピュータ100は中央処理装置(CPU)102、ランダム・アクセス・メモリ(RAM)104及びリード・オンリー・メモリ(ROM)106及び入出力(I/O)ユニット108にて構成されている。このデータ処理装置100には、命名すべき有機化合物に関するデータを入力するための入力装置110及び表示装置として機能するプリンタ122及び/又はディスプレイ124が接続されている。更に、データ処理装置100にはデータ記憶装置132、プログラム記憶装置134及びテーブル記憶装置136等の記憶装置が接続される。

入力装置110は、通常のアルフアベット、数字等によるデータの入力を行なうテキスト入力112と化学構造式等の形式でデータ入力を行なうグラフィック入力114とにて構成されている。入力装置110は、データ処理装置100を介してディスプレイ124に接続されており、入力データを表示する。ディスプレイ124は、グラフィック入力114を介して化学構造式の形式での

式と、新たに決定された入力された有機化合物に対応する名称が書込まれる。

プログラム記憶装置134には前記の命名プログラム(プログラムB)の他に、既知の名称より化学構造式を検索するためのプログラム(プログラムC)、同種又は類似する有機化合物を検索するためのプログラム(プログラムA)等が記憶されている。また、プログラム記憶装置には、上記の各プログラムを選択的に実行するためのメインプログラムが記憶される。テーブルメモリ136には、以下に説明するテーブル5〜31-2が収容される。

第6図は上記のメインプログラムの概略を示すフローチャートであり、テキスト入力112を介して入力される(ステップ1002)コマンドによつてデータ処理装置の動作モードが選択される。メインプログラムのステップ1004及び1006ではステップ1002で入力されたコマンドをチェックし、モードA(ステップ1008)、モードB(ステップ1010)及びモードC(ステッ

有機化合物に関するデータを入力する際の入力データ表示欄1241と、最終的に有機化合物に付与された名称を表示する名称表示欄と、及びデータ入力用のシンボルを表示するシンボル表示欄1243とにて構成される。従つてディスプレイ124上には、入力データとしての有機化合物の化学構造式と、これに対応する名称が表示し得るものとなる。

データ記憶装置132には、既に命名された有機化合物の名称と化学構造式が対応して記憶される。従つて、データ処理装置100は必要に応じて名称に対応するデータ記憶装置のアドレスをアクセスしてこれに対応する有機化合物の化学構造式を読出してディスプレイ上に表示し、又は入力された化学構造式に対応したデータ記憶装置のアドレスをアクセスして、既に名称を付与されている有機化合物の場合には、その記憶されている名称をディスプレイ上に表示する。また、データ記憶装置には後述する、命名プログラムが実行される度毎に新たに入力された有機化合物の化学構造

ブ1012)のいずれかを選択する。モードA(ステップ1008)においては上記した既知の名称及び/又は化学構造式の検索が行なわれ、そのため、上記したプログラムAが実行される。モードB(ステップB)においては以下に詳述するプログラムBが実行される。また、モードCにおいては、名称の入力より対応する化学構造式を検索するために、上記のプログラムCが実行される。

第7図は、上記プログラムBのフローチャートを示しており、上記のように化学構造式をグラフィック入力114を介して入力(ステップ1202)し、この化学構造式で表わされる有機化合物に名称を付与する。入力された化学構造式を示す入力データは、ステップ1204にて各構成要素に分解し、ステップ1206にてステップ1204にて分解された構成要素中の基本構造を抽出して、これに名称を付与する。これに基づいて、ステップ1208にて、第8-1(A)図乃至第8-5(I)図に示す結合表を形成する。

なお、第8-1(A)図乃至第8-5(I)図の結合表

において、各構成要素の数字は水素原子を除く有機化合物の原子の原子番号を示しており、この原子番号を以下に詳述する本発明によつて付与される規則に基づいて決定される。また、本発明による方法では、従来の命名法における原子番号の付与と昇順の付与に関連性をもたせていないために、通常数個の結合表が形成されることになる。なお、各結合表の01, 02, ……の数字は結合の数を示し、それに続くアルファベットは原子の種類を示している。

ステップ1210及び1212では、置換構造を構成する上記の基本構造を構成する構成要素以外の構成要素を順次命名して、これによりステップ1208で形成した結合表を変更する。ステップ1212では名称を付与されていない構成要素の存否をチェックし、全ての構成要素が命名され、結合表が完成すると、ステップ1214でディスプレイ124上に結合表を変換して得られる名称を表示し、又、要求すれば、プリンタ122を動作させて、結果をプリントさせる。

説明を単純にするため、以下のパラメータを用いる。

[X, Y] 行列成分 X-行, Y-行
[A] から [W] 前述のパラメータ

- a パラメータ [D] の a 番成分
- b パラメータ [D] の成分の最大番号
- c パラメータ [E] の c 番成分
- d パラメータ [E] の成分の最大番号
- x 計算に用いるパラメータ、パラメータ [D] あるいはパラメータ [E] の x-番目の成分について処理を実施するという意味

$TN(x, y)$ は $\sum_{xx=1}^{yy} x$ を意味する。

xx: 出発の値, yy: 終了の値

基本骨格を行列に変換する方法は、表5に基づきパラメータの組み合わせによつて選択しなくてはならない。表 5

パラメータ [A]	パラメータ [B]	意味	方法
なし	AN	I 型	(1)
CYCLO	AN	II 型	(2)
なし	AREN	III 型	(3)
CYCLO	AREN	IV 型	(4)

以下に、前記したテーブル記憶装置136に記憶されたテーブル5〜31-2について詳細に説明する。

9. コンピュータ処理用の結合表を作成する方法

本命名法の名称を用い、有機化合物のコンピュータ記号に通常用いる結合表は、次の方法により作成することが可能である。

結合表は、複数の行と列を持つゼロ行列の形態を有す。対角行列成分以外の全ての行列成分を、1個の原子と他の原子間の結合番号を意味するの用に用い、対角行列成分は原子の種類を意味するの用に用いる。

本方式で処理する有機化合物の水素以外の原子の一連の番号に関する各行列の行番号は、以下のプロセスを与えられる。各行列の列番号も同様である。

プロセスは、化合物の完全な名称の構成要素(前述2)の名称の順に行なわれる。

全体の結合表の作成は、構成要素の名称の各基本骨格を各結合表に変換する作業を容易にする。

方法 (1)

[X, Y] および行列成分の値は、成分が (R^CWC) 形を有するパラメータ [E] を用いて、表6に基づき得る。

表 6

X の値	Y の値	[X, Y] の値
2 $TN(c=1, d)$	X-1	1
$TN(c=1, x)$ $1 \leq x \leq c-1$	X-1	0
$1+TN(c-1, x)$ $2 \leq x \leq c$	X-1	1

方法 (2)

[X, Y] および行列成分の値は、 $(Ra:SaWa)$ の形を持つ成分のパラメータ [D] を用いて、表7より得る。

表 7

X の値	Y の値	[X, Y] の値
from 2 から $TN(a=1, b)$	X-1	1
$1+TN(a=1, x)$ $1 \leq x \leq c-1$	X-1	0
W_1	1	1
$TN(a=1, x)$ $2 \leq x \leq b$	Rx	1
Sx $2 \leq x \leq b$	$TN(a=1, x)$	1

方法 (3)

(X, Y) および成分の値は、 $(U_c - U'c, V_c W_c)$ の形を持つ変数 $[E]$ の情報に基づき得る。

Ⅲ群のどの場合でも、 $c = 1$ という第1成分を表8に基づき行なり。

表 8

X の値	Y の値	(X, Y) の値
6	1	9
2 から 6	X-1	9
8(y-1)+1 から 8(y-1)+4	X-1	9
8(y-1)+1	X-7	9
8(y-1)+4	X-9	9

次の処理は V_c の値に基づき選択し、 c の値が 2 から d となり、 x の範囲が 2 から d となる。

第1番目の処理は表9に基づく。

以下余白

表 9

Ux	X の値	Y の値	(X, Y) の値
A	STN(C-1, x-1)+8y+1	0<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+1	1<y<Wx-1	X-7
	STN(C-1, x-1)+6		X-9
B	STN(C-1, x-1)+8y+6	0<y<Wx-1	X-5
	STN(C-1, x-1)+8y+2	1<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+3	1<y<Wx-1	X-9
C	STN(C-1, x-1)+8y+3	0<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+6	0<y<Wx-1	X-5
	STN(C-1, x-1)+8y+6	0<y<Wx-1	X-1
D	STN(C-1, x-1)+8y+2	0<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+6	0<y<Wx-1	X-5
	STN(C-1, x-1)+8y+3	1<y<Wx-1	X-1
E	STN(C-1, x-1)+8y+1	1<y<Wx-1	X-9
	STN(C-1, x-1)+8y+4	1<y<Wx-1	X-7
	STN(C-1, x-1)+4		X-1
F	STN(C-1, x-1)+8y+6	1<y<Wx-1	X-5
	STN(C-1, x-1)+8y+6	0<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+3	0<y<Wx-1	X-1
G	STN(C-1, x-1)+8y+3	0<y<Wx-1	X-5
	STN(C-1, x-1)+8y+6	1<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+3	1<y<Wx-1	X-9
H	STN(C-1, x-1)+8y+6	1<y<Wx-1	X-5
	STN(C-1, x-1)+8y+3	0<y<Wx-1	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+4	1<y<Wx-1	X-9

第2番目の処理は、表10に基づき V_x の値に基づいて選択する。

表 10

V_x の値	方法
A	(a)
B または C	(b)
D	(d)
E	(e)
F または G	(f)
H	(h)

方法 (a)

$Wx = U'x$ なら、表11に従って結合表を完成させ、他の場合は表11による処理の後続ける。

表 11

事例	X の値	Y の値	(X, Y) の値
$U'x = 2$	STN(C-1, x-1)+y	5<y<6	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+8	0<y<U'x-2	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+4	0<y<U'x-2	X-1
	STN(C-1, x-1)+8y+4	1<y<U'x-1	X-9
	STN(C-1, x-1)+8(U'x-2)+3		8Ux-2
$U'x = 1$	STN(C-1, x-1)+8(U'x-1)+2		8Ux-7
	STN(C-1, x-1)+6		X-1
	STN(C-1, x-1)+2		8Ux-7
$U'x = 0$	STN(C-1, x-1)+3		8Ux-2
	STN(C-1, x-1)+6		8Ux-7

もし $Ux = TN(C-1, x-1)$ なら、結合表は表12に基づく方法で完成させる。他の場合は、表12を参照する。

表 12

X の値	Y の値	(X, Y) の値
STN(C-1, x-1)+8y+2	0'x<=y<Wx-1	X-1
STN(C-1, x-1)+8y+4	U'x+1<=y<Wx-1	X-1
STN(C-1, x-1)+8y+4	U'x+1<=y<Wx-1	X-9
STN(C-1, x-1)+8U'x+1		8Ux-6

$STN(C-1, x-1) - Ux = Wx - U'x$ なら、処理は表13により行ない、他の場合は表14による

表 13

X の値	Y の値	(X, Y) の値
STN(C-1, x-1)+8y+1	8(Ux+y)+1	9
U'x<=y<Wx-1		

表 14

X の値	Y の値	(X, Y) の値
STN(C-1, x-1)+8y+1	8(Ux+y)+1	9
U'x<=y<STN(C-1, x-1)-Ux+U'x		
STN(C-1, x-1)+8y+3	X-1	9
STN(C-1, x-1)+8y+4	X-1	9
STN(C-1, x-1)-Ux+U'x+1<y<Wx-1		
STN(C-1, x-1)+8y+3	STN(C-1, x-1)-6	9
STN(C-1, x-1)+8y+3		
y<STN(C-1, x-1)-Ux+U'x		

方法 (b)

(X, Y) 及び行列の値は、表 15 のように U_x および U'_x の値により得る。

表 15

事 例	X の値	Y の値	(X, Y) の値
$U'_x = -1$	$STN(C-1, X-1) + 6$	$X-1$	9
	$STN(C-1, X-1) + 5$	$8U_x - 2$	9
	$STN(C-1, X-1) + 2$	$8U_x - 7$	9
$U_x = STN(C-1, X-1)$	$STN(C-1, X-1) + 3$	$X-1$	9
	$STN(C-1, X-1) + 4$	$8U_x - 4$	9
	$STN(C-1, X-1) + 6$	$8U_x - 7$	9
$U'_x = 0$ 及び $U_x = STN(C-1, X-1)$	$STN(C-1, X-1) + 5$	$8U_x - 7$	9
	$STN(C-1, X-1) + 2$	$8U_x + 1$	9

方法 (d)

(X, Y) 及び行列成分の値は表 16 によつて得る。

表 16

X の値	Y の値	(X, Y) の値
$STN(C-1, X-1) + 3$	$X-3$	9
$STN(C-1, X-1) + 4$	$X-4$	9

方法 (e)

(X, Y) 及び行列成分の値は、表 17 によつて得る。

表 17

X の値	Y の値	(X, Y) の値
$STN(C-1, X-1) + 1$	$X-4$	9
$STN(C-1, X-1) + 2$	$X-4$	9

$U_x = STN(C-1, X-1)$ なら、結合表は表 20 に基づく方法で完成させる。また他の場合、表 20 は無視する。

表 20

X の値	Y の値	(X, Y) の値
$STN(C-1, X-1) + 5y + 3$	$U'_x(-y(-W_x-1))$	$X-1$
$STN(C-1, X-1) + 5y + 2$	$U'_x + 1(-y(-W_x-1))$	$8U_x - 2$
$STN(C-1, X-1) + 5y + 1$	$U'_x + 2(-y(-W_x-1))$	$8U_x - 7$
$STN(C-1, X-1) + 5U'_x + 2$		$8U_x - 5$

$STN(C-1, X-1) - U_x = W_x - U'_x$ なら、表 21 により処理を行ない、他の場合なら表 22 による。

表 21

X の値	Y の値	(X, Y) の値
$STN(C-1, X-1) + 5y + 3$	$U'_x(-y(-W_x-1))$	$8(U_x + y) + 4$

表 22

X の値	Y の値	(X, Y) の値
$STN(C-1, X-1) + 5y + 1$	$U'_x(-y(-W_x-1)) - U_x + U'_x$	9
$STN(C-1, X-1) + 5y + 3$	$STN(C-1, X-1) - U_x + U'_x(-y(-W_x-1))$	9
$STN(C-1, X-1) + 5y + 2$	$STN(C-1, X-1) - U_x + U'_x(-y(-W_x-1))$	9
$STN(C-1, X-1) + 5y + 1$	$STN(C-1, X-1) - U_x + U'_x + 1(-y(-W_x-1))$	9
$STN(C-1, X-1) + 5y + 1$	$STN(C-1, X-1) - U_x + U'_x + 1(-y(-W_x-1))$	9
$STN(C-1, X-1) + 5y + 2$	$STN(C-1, X-1) - U_x + U'_x$	9

方法 (f)

(X, Y) 及び行列の値は、表 18 のごとく U_x 及び U'_x の値によつて得る。

表 18

事 例	X の値	Y の値	(X, Y) の値
$U'_x = -1$	$STN(C-1, X-1) + 6$	$X-1$	9
	$STN(C-1, X-1) + 5$	$8U_x - 3$	9
	$STN(C-1, X-1) + 3$	$8U_x - 4$	9
$U_x = STN(C-1, X-1)$	$STN(C-1, X-1) + 3$	$X-1$	9
	$STN(C-1, X-1) + 2$	$8U_x - 3$	9
	$STN(C-1, X-1) + 5$	$8U_x - 4$	9
$U'_x = 0$ 及び $U_x = STN(C-1, X-1)$	$STN(C-1, X-1) + 6$	$8U_x - 4$	9
	$STN(C-1, X-1) + 2$	$8U_x + 1$	9

方法 (h)

$W_x = U'_x$ なら、結合表は表 19 によつて完成させ、他の場合は表 19 の処理後に行なう。

表 19

事 例	X の値	Y の値	(X, Y) の値
$U'_x = -1$	$STN(C-1, X-1) + 6$	$X-3$	9
	$STN(C-1, X-1) + 5$	$X-1$	9
	$STN(C-1, X-1) + 5y + 3$	$0(-y(-U'_x-2))$	$X-1$
	$STN(C-1, X-1) + 5y + 2$	$0(-y(-U'_x-2))$	$X-1$
	$STN(C-1, X-1) + 5y + 1$	$1(-y(-U'_x-1))$	$X-7$
	$STN(C-1, X-1) + 5(U'_x-2) + 2$	$8U_x - 3$	9
$U'_x = 1$	$STN(C-1, X-1) + 6$	$8U_x - 4$	9
	$STN(C-1, X-1) + 5$	$8U_x - 3$	9
	$STN(C-1, X-1) + 3$	$8U_x - 4$	9
$U'_x = 0$	$STN(C-1, X-1) + 3$	$8U_x - 4$	9

方法 (i)

(X, Y) 及び行列成分の値は $(R_a; S_{a, W_a})$ の形を持つ成分のバリエブル (D) および (V_a) の形を持つ成分のバリエブル (E) の情報によつて得る。

この場合のバリエブル (Z) が用いられるなら、 Z はバリエブル (E) の Z 番目の成分を意味する。

$$1 < z < d$$

初めに、表 23 により処理を行う。

表 23

X の値	Y の値	(X, Y) の値
6	1	9
5	$6(-y(-5))$	$X-1$
$5(X-1) + 4$	$1(-y(-5))$	$X-1$
$5(X-1) + 3$	$1(-y(-5))$	$X-1$
$5(X-1) + 2$	$1(-y(-5))$	$X-1$
$5(X-1) + 1$	$1(-y(-5))$	$X-1$
$STN(A-1, X) - 2$	$1(-y(-5))$	0
$STN(A-1, X) - 3$	$1(-y(-5))$	0
$STN(A-1, X) - 4$	$1(-y(-5))$	0
$STN(A-1, X) + 2$	$2(-y(-5))$	$X-1$
$STN(A-1, X) + 3$	$2(-y(-5))$	$X-1$
$STN(A-1, X) + 4$	$2(-y(-5))$	$X-1$

二番目の処理は、表25からの V_x の値により選択する。但し、 z の値が以下のような場合、処理は行なわない。

$$z = 6TN(a-1, x) + 1 \quad 1 \leq x \leq b-1$$

$$z = 6TN(a-1, x) \quad 1 \leq x \leq b$$

表 25

V_x の値	x の値	y の値	(x, y) の値
"V"	$8x+1$	$8x-7$	9
	$8x+4$	$8x-6$	9
"P"	$8x+1$	$8x-6$	9
	$8x+4$	$8x-5$	9
"M"	$8x+1$	$8x-5$	9
	$8x+4$	$8x-4$	9

表26により、第一番目の w_x について処理を行なう。

以下余白

$w_x=1$ の場合、処理は表28あるいは表29によつて行なり。 R'_x がなければ、処理は表28-1及び表28-2によつて行なり。

以下余白

表 26

V_x の値	V_x の値	x の値	y の値	(x, y) の値
"V"	全ての事例	$8x-4$	$8x-5$	9
		$8x-4$	5	9
		$8x-7$	$8x-13$	0
	"V"	$8x-13$	6	9
		$8x-7$	$8x-14$	0
		$8x-14$	6	9
"P"	全ての事例	$8x-7$	$8x-13$	0
		$8x-13$	6	9
		$8x-4$	5	9
	"P"	$8x-4$	5	9
		$8x-6$	$8x-7$	9
		$8x-4$	5	9
"M"	全ての事例	$8x-6$	$8x-7$	9
		$8x-4$	5	9
		$8x-14$	5	9
	"M"	$8x-4$	$8x-13$	0
		$8x-13$	5	9
		$8x-4$	$8x-12$	0

$w_x=0$ の場合、処理は表27に基づき行なり。

表 27

V_{Sx} の値	x の値	y の値	(x, y) の値
全ての事例	$8Sx-4$	$8Sx-5$	0
	$8Sx-5$	$8Sx-6$	0
	$8Sx-6$	$8Sx-4$	9
"V"	$8Sx-4$	$8Sx-14$	0
	$8Sx-14$	$8Sx-5$	9
"P"	$8Sx-4$	$8Sx-13$	0
	$8Sx-13$	$8Sx-5$	9
"M"	$8Sx-4$	$8Sx-12$	0
	$8Sx-12$	$8Sx-5$	9

表 28-1

S'_x の値	$V_{TN(a-1, x)}$ の値	x の値	y の値	(x, y) の値
なし	"V"	$8Sx-4$	$8Rx-5$	9
		$6TN(a-1, x)-5$	$8Sx-5$	9
		$6TN(a-1, x)-4$	$6TN(a-1, x)-5$	9
		$6TN(a-1, x)-4$	$8Rx-4$	9
		$6TN(a-1, x)-7$	$8Rx-5$	9
		$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-4$	9
	"P"	$6TN(a-1, x)-4$	$8Rx-4$	9
		$6TN(a-1, x)-4$	$8Sx-5$	9
		$6TN(a-1, x)-7$	$8Rx-5$	9
		$6TN(a-1, x)-6$	$6TN(a-1, x)-7$	9
		$6TN(a-1, x)-6$	$8Sx-4$	9
		$8Sx-5$	$8Rx-4$	9

表 28-2

S'_x の値	$V_{TN(a-1, x)}$ の値	V_{Sx} の値	x の値	y の値	(x, y) の値
$Sx+1$	"V"	全ての事例	$6TN(a-1, x)-4$	$8S'_x-4$	9
			$6TN(a-1, x)-4$	$8Rx-4$	9
			$8Sx-5$	$8Rx-5$	9
		"V"	$8Sx-4$	$8Rx-5$	9
			$6TN(a-1, x)-7$	$8Rx-5$	9
			$8S'_x-4$	$8Rx-4$	9
	"P"	全ての事例	$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-5$	9
			$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-5$	9
			$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-4$	9
		"P"	$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-4$	9
			$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-4$	9
			$6TN(a-1, x)-7$	$8Sx-4$	9

S'_x がなければ、表29に基づき処理を行なり。

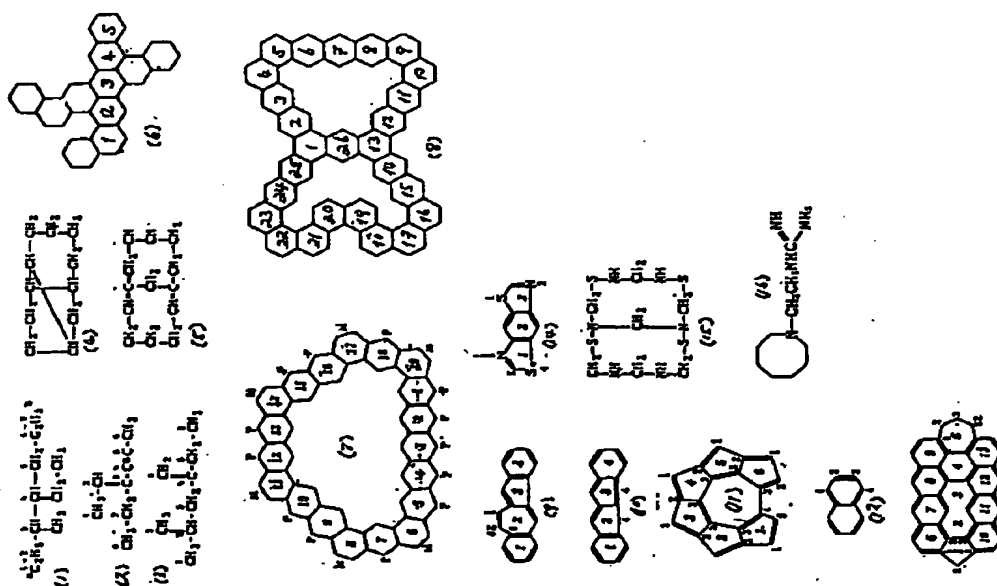
表 31-2

S'x の値	V _{TR} (a-1, z) の値	V _{TR} (a-1, x)-1 の値	V _{Sx} の値	X の値	Y の値	(X, Y) の値
Sx+1	"V"	全ての事例		STN(a=1, x)-4	SS'x-4	9
		"V"	全ての事例	STN(a=1, x)-7	STN(a=1, x)-15	0
		"V"	"V"	STN(a=1, x)-15	SSx-5	9
		"P"	"P"	STN(a=1, x)-15	SSx-4	9
		"P"	全ての事例	STN(a=1, x)-7	STN(a=1, x)-14	0
		"V"	"V"	STN(a=1, x)-14	SSx-5	9
		"P"	"P"	STN(a=1, x)-14	SSx-4	9
		"H"	全ての事例	STN(a=1, x)-7	STN(a=1, x)-15	0
		"V"	"V"	STN(a=1, x)-7	SSx-5	9
		"P"	"P"	STN(a=1, x)-15	SSx-5	9
		"V"	"V"	STN(a=1, x)-15	SSx-5	9
		"P"	"P"	STN(a=1, x)-15	SSx-4	9
		"H"	全ての事例	STN(a=1, x)-4	STN(a=1, x)-14	0
		"V"	"V"	STN(a=1, x)-14	SSx-5	9
		"P"	"P"	STN(a=1, x)-14	SSx-4	9
		"H"	全ての事例	STN(a=1, x)-4	STN(a=1, x)-12	0
		"V"	"V"	STN(a=1, x)-12	SSx-5	9
		"P"	"P"	STN(a=1, x)-12	SSx-4	9

以下に本発明の上記の実施例による方法によって命名された有機化合物の名称を英文表記及び化学構造式の形式で例示する。

1. The name of organic compounds on this nomenclature are followings according to the Fig. 1.

1. deca[7³1⁴2]carbane
2. octa[6²2]carban-2-en-4-yne
3. octa[6²1⁴]carban-4:8-ene
4. tricycloundeca[11¹5⁰2:7⁰]carbane
5. dicyclotrideca[13¹7¹]carban-1,6,9-triene
6. undeca[5¹-1A₁2C₂3A₁3G₂]arene
7. cycloocta[8^H]arene
8. dicyclohexacosaa[26¹13¹](1V₂PH₃P₂MP₁V₂F₃N₃V₃M₂P₁P₂)arene
9. tetra[4]areno-2⁶8-homo-3⁴-norade
10. tetra[4]areno-1⁴,3⁴-dinorade
11. hexa[6]areno-1⁶,2⁴,3⁴,4⁴,5⁴,6⁴-hexanor-1⁴,5³-cyclade
12. diareno-2:3-didehydrate
13. trideca[5¹A₄1A₄]areno-2²:3³-seco-1²3-homo-1⁴-nor-1³,2³:3²-tetrahydrate
14. tri[3]areno-1⁶,3⁴-dinor-1⁴,3¹-dihydro-1₁,3³-diaz-1⁴-selena-3²-sulfade
15. dicycloheptadeca[16¹7¹]carbano-1,4,6,9,12,14-hexaasa-1,7,10,16-tetrasulfade
16. cyclooctacarbano-1-(assy1-2-dicarbano-1-ylazylcarbasantaset)



また、本発明の命名法によって命名された代数的な薬品の名
稱を以下に示す。

1: ビ[ツカルバノ-1-ケラント]-2, 2'-ビイルアスカ
ルバントオキシセント

2: テトラ[4]カルバノ-1, 4-ジイルオキシイルスルアピオ
キシセントカルバント

3: オクタ[5, 1, 1, 1]カルバノ-1, 6-ジイルオキシイ
ルカルアザントオキシセント

4: ビ[シクロオクタカルバノ-1-(アザイル-2-ツカルバノ
-1-イルアズイルカルアザント-アザント) スルフェー
ト

5: テル[トリカルバノアザ]-1, 1', 1'-テルイルアス
フスルフェント

6: シクロヘキサカルバノ-1-アザ-3-オキサ-2-(フェス
ファオキシセントイルアズイル-2-ツカルバノ-1-クロラ

ント)

7: シシクロデカ[6, 1, 1, 4]カルバノ-4, 7, 9-トリアザ
-10-オキシセント-7-イルアレン-4-イル-4-テトラ
[4]カルバノ-1-(オキシセントイル-4-アレノ-1-フ
ルオラント)

8: ビ[ノルアレノ-1-(ハイドロスルファ)]-2, 2'-ビ
イルカルアイルイリデン-5-シクロヘキサ-カルバノ-1-
アザイルム-1, 1-ビカルバント-3-イルオキシカルバン
ト

9: ノルツアレノ-1/3-トリハイドロ-1, 3-ツアザ-2-
オキシセント-1-イル-6-シクロヘキサ-カルバノ-1-(
アザイル-4-テトラ[4]カルバノ-1, 1-ジイル-4-
アレノ-1-フルオラント)

10: ビ[シクロペンタカルバノ-1-(アザイルムカルバント)]-
1, 1'-ビイル-1, 3-トリカルバノ ビ[テトラ[4]

カルバノ-1-アシド-4-アシデート-2, 3-ジオキサント]

11: シクロペンタカルバノアザ-2-オキシセント-1-イル-1-トリデカ [12, ⁶1] カルバン-2, 4, 6-トリエノ-8-オキシセント-1-オキシセント

12: シクロヘキサカルバン3, 5-ジアザ-1-フルオラント-4, 6-ジオキサント-3-イル-2-シクロペンタカルバノオキシエード

13: ビ [アレノイル-2-トリカルバノ-1- (アシドイル-6-ジシクロオクタ [7, ¹⁰1] カルバノ-8- (アザイウムカルバント)-3-オキシセント] スルフェート *1

14: ビアレノビル-2, 2-ジカルバノ-1- (アシドイル-6-トリシクロデカ [7, ¹¹1 ⁸2 4] カルバノ-8-アザイウム)-2-オキシセント クロライド *1

19: ジソデウム トリノルジアレノバー-ハイドロ-22-アザ-5-スルファ-4, 4-ジカルバント-2-オキシセント-3- (イルカルブアシデート)-1-イルアズイル-2-ジカルバノ-2-オキシセント-1-イルアレン²-1-イルスルフビオキシアシデート

20: ジノルジアレノ-1/2Z, 5/6Z-ヘキサハイドロ-2Z-アザ-6-スルファ-4-カルバント-2-オキシセント-1- (イルアズイル-2-ジカルバノ-1-アザント-2-オキシセント-1-イルアレン)-3-イルカクブアシッド

21: ジアレノ-1, 3, 5, 8-テトラアザ-2, 4-ジアザント-6-イルカルブイルアズカルバント-イル-4-アレノ-1-イルカルブオキシセントイルアズイル-2-ペンタ [5] カルバノ-1, 5-ジアシド

22: ジアレノ-2, 3-ジアザ-1-イル-2-ジアザノ-1-イルオキシシル-1-トリカルバノ-1-オキシセント ハイドクロライド

15: アレノイル-2-トリカルバノ-1- (アシドイル-7-トリシクロノナ [8, ¹¹5 1²7 0] カルバノ-9-アザイウム-3-オキサ-9, 9-ジカルバント)-3-オキシセント プロミド *1

16: ジシクロオクタ [7, ¹²1] カルバノ-6-アザイウム-1, 6, 8, 8-テトラカルバント-8-イル-3-トリカルバノ-イルアズイウムテルカルバント ビ [カルバノイルオキシスルフビオキ-アシデート]

17: ジシクロヘプタ [6, ¹³1] カルバノ-2, 2, 3-トリカルバント-3-イルアズカルバント ハイドロクロライド

18: ジアレノ-1/4-テトラハイドロ-2, 4-ジアザ-1- (スルファビオキシセント)-6- (イルカルブテルフルオラント)-3-イル-1-ヘキサ [6] カルバン7-イルスルファザントビオキシセント

23: ノルジアレノ-1/3-トリハイドロ-1-オキサ-2:2- (ビル-1, 5-ヘキサ [6] カルバン-1-エノ-3-オキシセント-1-イルオキシカルバント)-7-クロラント-3-オキシセント-4, 6-ジイルオキシカルバント

24: ノルジアレノ-1/3-トリハイドロ-2-アザ-1-オキシセント-3-オキシセント-1-イル-4-アレノ-1-クロラント-2-イルスルファザントビオキシセント

25: ジアレノ-2-アザ-1- (イルカルブイル-4-アレノ-1, 2-ジイルオキシカルバント)-6, 7-ジイルオキシカルバント ハイドロクロライド

26: ホモジアレノ-7-ハイドロ-5, 8-ジアザ-2-クロラント-8-オキシセント-9-イルアレン-6-イルアズカルバント

27: トリ [2¹ 1] アレノ-2²-ホモ-1⁶-ノル-1, 2³-オクタハイドロ-1¹, 2³-ジアザ-1¹-オキサ-3¹-クロラント-2²-オキシセント-1¹-イル-2-アレノ-1-クロラント

28: トリ [3] アレノ-2¹-ジハイドロ-2¹-アザ-2⁴-スル

ア-1⁴-クロラント-2¹-イル-3-トリカルバノ-1-イル
アズピカルバント

-ウオキシセント-1¹- (イルアズピカルバント) -1⁵-イルカ
ルアザントオキシセント

29:トリ〔3〕アレノ-2^{1,4}-ツハイドロ-2¹-スルファ-2²-
(イリデン3-トリカルバノ-1-イル-4-シクロヘキサカ
ルバノ-1, 4-ツアザ-1-カルバント)-1⁴-イルスル
フ-⁴ビオキシセント⁴ルアズピカルバント

33:ペンタ〔3¹, 2〕アレノ-4⁴-ノル-2², 4¹-ツアザ-1, 2
, 3^{1,4}-ドデカハイドロ-1¹- (イルカルアアシドカルバント
)-1⁴, 5²-ツ (イルオキシカルバント)-1⁵-イルオキシカ
ルアオキシセントイル-5-アレノ-1, 2, 3-トリイルオキ
シカルバント

30:トリ〔3〕-アレノ-2^{1,2}-ホモ-2²-ハイドロ-2²-アザ-
2²-スル~~フ~~ア-1⁴-クロラント-2^{1,2}-イル-4-シクロヘ
キサカルバノ-1, 4-ツアザ-1-カルバント

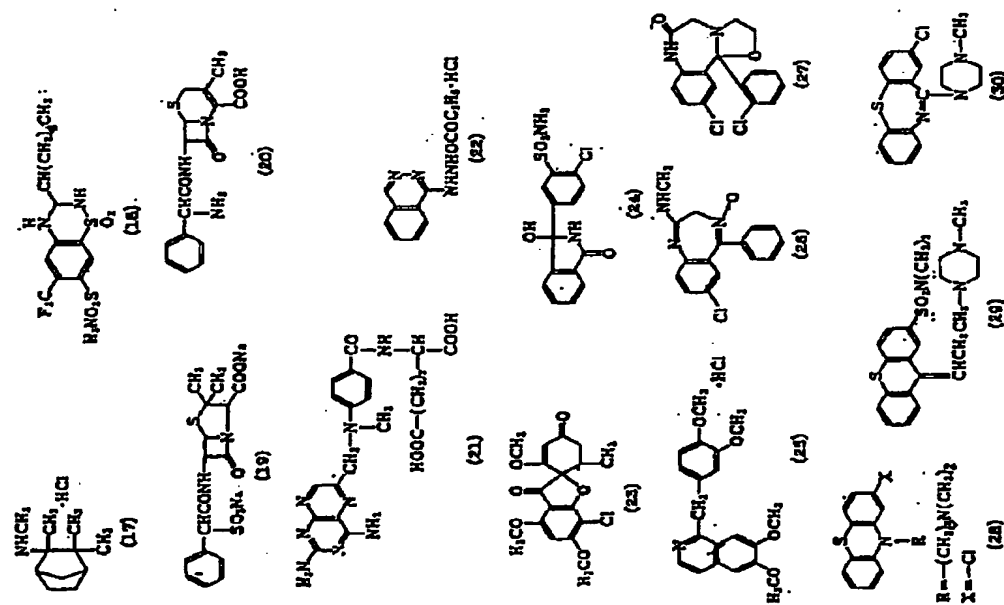
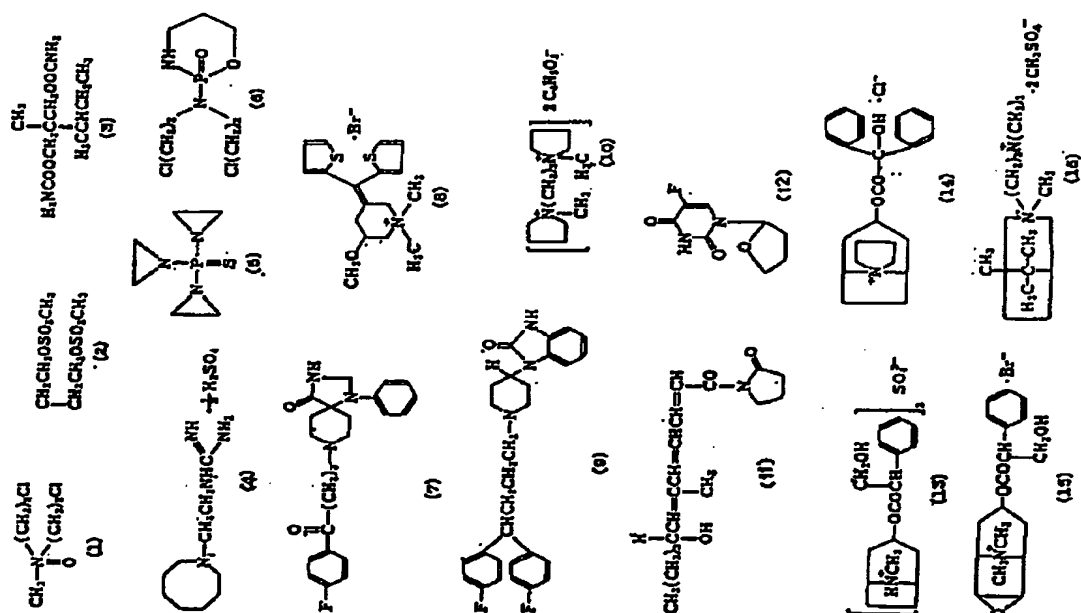
34:テトラ〔3¹, 1〕アレノ-2¹-ノル-2, 3, 4^{1,6}-ノナハ
イドロ-2², 4⁴-ツアザ-2²:4⁴-ビイル-1, 2-ツカルバン
3⁴- (オキシセントイルカルアアシッドカルバント)-2²- (イ
ルカルアオキシセント)-3²-イルツカルバン-1⁴- (イルオキ
シカルバント)-3²- (イルオキシイル-1-ツカルバノオキ
セント)-1⁴-イル-7-ツシクロウンデカ〔10, 1^{1,5}〕カ
ルバノ-1-アザ=8 (2:3)- (ノルツアレノ-1- (ハ
イドロアゼ-ド))-3-オキシセント-7- (イルカルアア
シッドカルバント)-3-イルツカルバン

31:トリ〔3〕アレノ-2²-ノル-1^{1,5}-シクロ-1, 2², 3^{1,4}-
ノルハイドロ-1^{1,4}-ツアザ-3²-アザント-3²-カルバント-2¹-
(イルカルアイルオキシイルカアアザントオキシセント)=1²-イルオ
キシカルバント

32:テトラ〔4〕アレノ-1^{1,4}, 2^{1,2}, 3^{1,4}-オクタハイドロ-3¹
-カルバント-1^{1,4}, 2², 3¹, 4²-ペンタオキシセント-1⁴, 3⁴

35:テトラ〔3¹, 1〕アレノ-2, 3, 4-ドデカハイドロ-2²-
オキサ-2¹:3¹-ビイル-1, 2= (ジカルバノオキセ-ド)-1⁵,
2², 4^{1,2}-テトラカルバント-1¹-オキシセント

なお、上記の1乃至35の名称に対応する英文表記及び化学構造式
を以下に対応する番号を付して列記する。



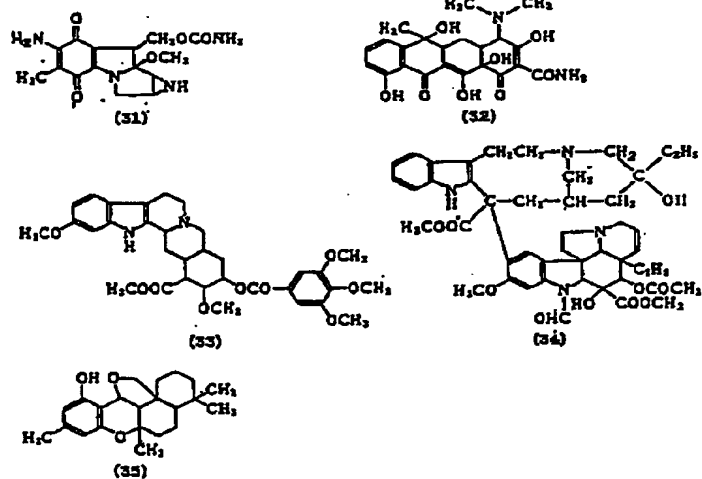
なお、巻末に添付する別表は、上記したプログラムBを富士通製「FACOM 9450-II」に適用した実際のプログラムのプリントアウトであり、開示の一部を構成する。

4. 図面の簡単な説明

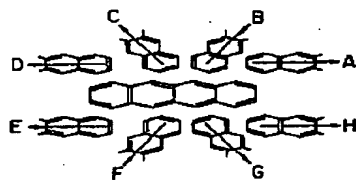
第1図乃至第3図は本発明による有機化合物の名称付与の順序を示す説明図、第4図は本発明の好適実施例による装置のブロック図、第5図はディスプレイの説明図、第6図はメインプログラムのフローチャート、第7図はプログラムB（命名プログラム）のフローチャート、第8-1(A)図乃至第8-5(I)図は結合表の例を示す図である。

100：データ処理装置、110：入力装置、
122：プリンタ、124：ディスプレイ、
132：データ記憶装置、134：プログラム記憶装置、
136：テーブル記憶装置。

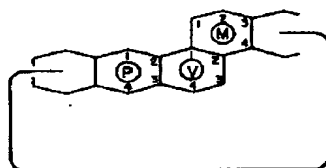
代理人 弁理士 志賀富士弥



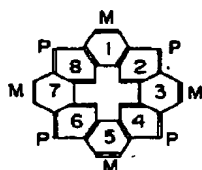
第1図



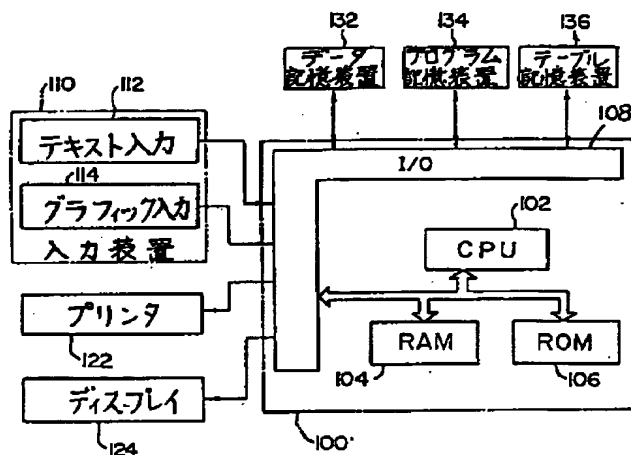
第2図



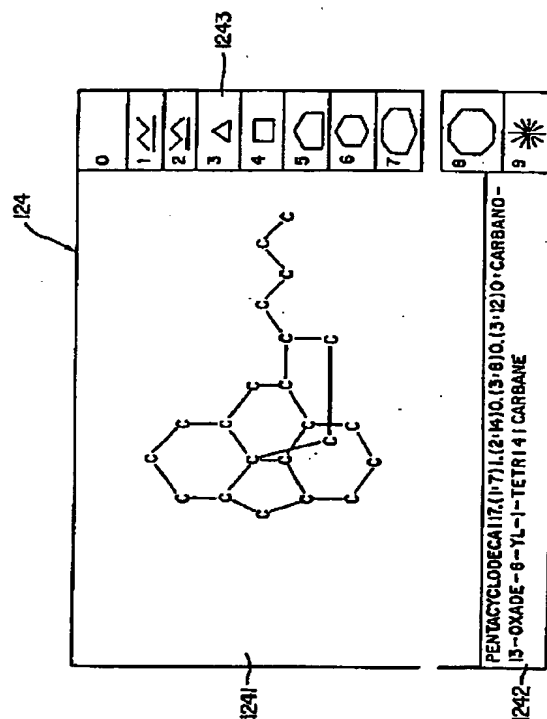
第3図



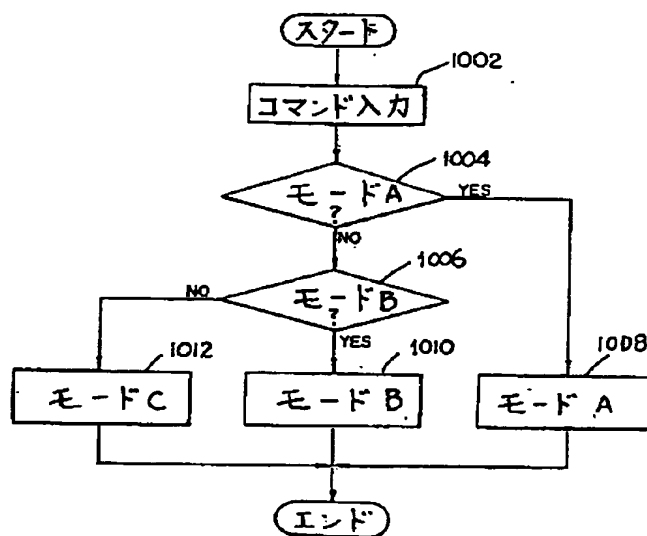
第4図



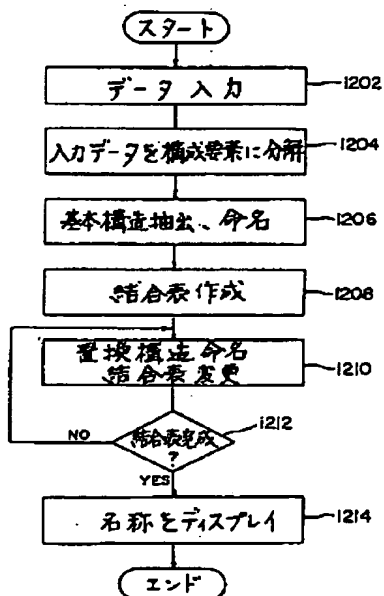
第五圖



第6図




第 7 図



第8-1(A)圖



11: C
27: +IC
32: +IC
41: +IC
55: +IC
65: +IC
77:
89:
95: +IC
105: +IC
115: +IC
125:
135:
145:
155:
165:
175:
185: +IC
195: +IC
205: +IC
215: +IC
225:
235:
245:



第 8-1(B) 図



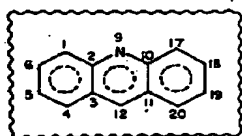
1: C
2: +C
3: +IC
4: +IC
5: +IC
6: +IC
7: +IC
8: +IC
9: +IC
10: +IC
11: +IC
12: +IC
13: +IC

第8-2(A)図

TRI(3)ARENO-2(1)-AZADE

(TYPE A)

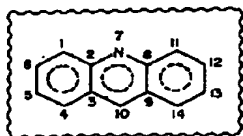
1: C
2: +HC
3: +HC
4: +HC
5: +HC
6: +HC
7: +HC
8: +HC
9: +HC
10: +HC
11: +HC
12: +HC
13: +HC
14: +HC
15: +HC
16: +HC
17: +HC
18: +HC
19: +HC
20: +HC
21: +HC
22: +HC
23: +HC
24: +HC



第8-2(B)図

(TYPE B)

1: C
2: +HC
3: +HC
4: +HC
5: +HC
6: +HC
7: +HC
8: +HC
9: +HC
10: +HC
11: +HC
12: +HC
13: +HC
14: +HC

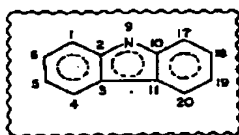


第8-4(A)図

TRI(3)ARENO-2(4)-NOR-2(1)-AZADE

(TYPE A)

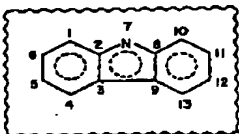
1: C
2: +HC
3: +HC
4: +HC
5: +HC
6: +HC
7: +HC
8: +HC
9: +HC
10: +HC
11: +HC
12: +HC
13: +HC
14: +HC
15: +HC
16: +HC
17: +HC
18: +HC
19: +HC
20: +HC
21: +HC
22: +HC
23: +HC
24: +HC



第8-4(B)図

(TYPE B)

1: C
2: +HC
3: +HC
4: +HC
5: +HC
6: +HC
7: +HC
8: +HC
9: +HC
10: +HC
11: +HC
12: +HC
13: +HC

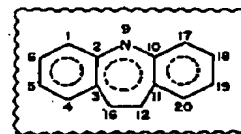


第8-3(A)図

TRI(3)ARENO-2(4Z)-NOMO-2(1)-AZADE

(TYPE A)

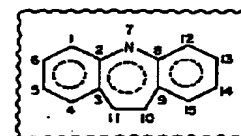
1: C
2: +HC
3: +HC
4: +HC
5: +HC
6: +HC
7: +HC
8: +HC
9: +HC
10: +HC
11: +HC
12: +HC
13: +HC
14: +HC
15: +HC
16: +HC
17: +HC
18: +HC
19: +HC
20: +HC
21: +HC
22: +HC
23: +HC
24: +HC



第8-3(B)図

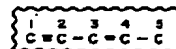
(TYPE B)

1: C
2: +HC
3: +HC
4: +HC
5: +HC
6: +HC
7: +HC
8: +HC
9: +HC
10: +HC
11: +HC
12: +HC
13: +HC
14: +HC
15: +HC



第8-5(A)図

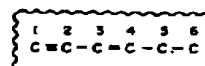
PENTA(5)CARBAN-3-EN-1-YNE



1: C
2: C≡C
3: C=C
4: C=C
5: C=C

第8-5(B)図

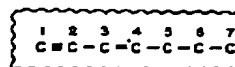
HEXA(6)CARBAN-3-EN-1-YNE



1: C
2: C≡C
3: C=C
4: C=C
5: C=C
6: C=C

第8-5(C)図

HEPTA(7)CARBAN-3-EN-1-YNE

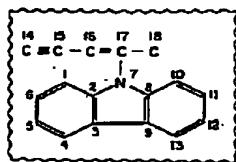


1: C
2: C≡C
3: C=C
4: C=C
5: C=C
6: C=C
7: C=C

第8-5(D)図

TRIC3ARENO-2(4)-NOR-2(1)-AZA-2(1)-YL-4-PENTAC3CARBAN-3-OH-1-YNE

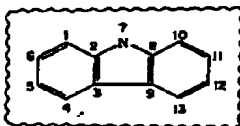
1: C
2: +IC
3: +IC
4: +IC
5: +IC
6: +IC
7: +IC
8: +IC
9: +IC
10: +IC
11: +IC
12: +IC
13: +IC
14: +IC
15: +IC
16: +IC
17: +IC
18: +IC



第8-5(E)図

TRIC3ARENO-2(4)-NOR-2(1)-AZADE

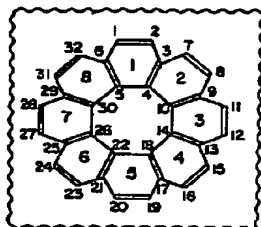
1: C
2: +IC
3: +IC
4: +IC
5: +IC
6: +IC
7: +IC
8: +IC
9: +IC
10: +IC
11: +IC
12: +IC
13: +IC



第8-5(G)図

CYCLOOCTA(8)C8(M)ARENE

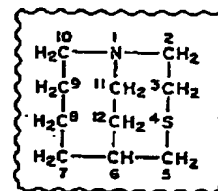
1: C
2: +IC
3: +IC
4: +IC
5: +IC
6: +IC
7: +IC
8: +IC
9: +IC
10: +IC
11: +IC
12: +IC
13: +IC
14: +IC
15: +IC
16: +IC
17: +IC
18: +IC
19: +IC
20: +IC
21: +IC
22: +IC
23: +IC
24: +IC
25: +IC
26: +IC
27: +IC
28: +IC
29: +IC
30: +IC
31: +IC
32: +IC



第8-5(F)図

DICYCLODODECA(10, (1:6)2)CARBANO-1-AZA-4-SULFADE

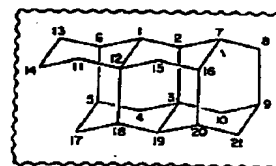
1: N
2: OIC
3: OIC
4: OIS
5: OIC
6: OIC
7: OIC
8: OIC
9: OIC
10: OI
11: OI
12: OI



第8-5(H)図

TETRA(2, (1:1)2)ARENO-PERYDRO-1(5):3(2):1(3):4(2):2(3)-OQSNTYL-1,2,3,4,5-PENTA(5)CARBANE

1: C
2: OIC
3: OIC
4: OIC
5: OIC
6: OIC
7: OIC
8: OIC
9: OIC
10: OIC
11: OIC
12: OIC
13: OIC
14: OIC
15: OIC
16: OIC
17: OIC
18: OIC
19: OIC
20: OIC
21: OIC



第8-5(I)図

TRIDECA (7, (2), (4), 3, (5), 2) CARBAN-3-ENO-1-YL-1-[(1)OXANE-10-(YL-1-[(1)AZANO-1-YL-1-(1)CARBAME)-7-(YL-1-[(1)AZANO-1-YLIDEN-2-TETRA(4)CARBANO-1-YL-1-[(1)OXANE)-8-(1)YLIDEN-2-DI(2)AZANO-1-YL-1-(1)CARBANO-1-YL-1-[(1)AZANE-1-YLIDEN-1-(1)SULFANE)-8-YL-1-[(1)OXANO-1-YL-1-(1)CARBAME)-13-YL-1-(1)SULFANO-1-YL-1-(1)AZANO-1-YL-1-(1)CARBAME]

